

ние моделей с более реалистичными потенциалами взаимодействия, нежели модель, в которой молекулы рассматриваются как твердые сферы.

Анализ результатов показал, что учет потенциала взаимодействия, накладывает изменения не только на этап разыгрывания косинусов углов рассеяния, но и на другие этапы реализации метода мажорантной частоты. Эти данные могут быть использованы в расчете блоков, которые содержат газ. Например, при истечении ксенона из-под поврежденных оболочек ТВЭЛов.

Кроме того интерес представляет и модельная задача для истечения газа в каналах свободномолекулярном и промежуточных режимах, когда радиус канала сопоставим с длиной свободного пробега молекулы.

МОДЕЛЬ АКТИВНОГО ТРАНСПОРТА ГЛУТАМАТА В НЕЙРОН МЛЕКОПИТАЮЩЕГО

Сутормина М.И.^{*}, Мелких А.В.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

^{*}E-mail: marie-ya@mail.ru

Нейромедиаторы представляют собой молекулы, используемые для открывания каналов, управляющих генерацией нервного импульса в нейронах [1]. Например, синтезированный в персинаптическом нейроне глутамат собирается в синаптические пузырьки активной транспортной системой совместно с хлором в обмен на ионы водорода. Модель транспорта глутамата в пузырьки в клетке нейрона построена ранее [2]. В состоянии покоя нейромедиаторы хранятся в синаптических пузырьках. При протекании нервного импульса нейромедиаторы выходят из пузырьков и обеспечивают открытие каналов соседней клетки [1]. После того, как нейромедиаторы открыли каналы, и нервный импульс состоялся, они должны как можно быстрее быть закачаны обратно в клетку. В противном случае будет иметь место неконтролируемая генерация нервного импульса. Для закачки используются градиенты различных ионов по обе стороны биомембраны (чаще всего ионов натрия). Полагая, что процесс транспорта нейромедиаторов происходит за время между импульсами, на основе модели [2-3] рассчитаем остаточную концентрацию глутамата в синаптической щели. Из [1] известно о двух активных транспортных системах – первая переносит медиатор совместно с ионами натрия в обмен на ионы калия и OH^- , вторая – одновременно закачивает в нейрон ионы натрия, хлора и глутамат. Зная значения концентраций ионов в нейроне [3] и используя рассчитанное ранее значение концентрации глутамата [2], получим, что изолированно друг от друга транспортные системы создают внутриклеточную концентрацию, соответственно,

0,0005 (натрий-калиевый механизм) и 0,007 (натрий-хлор) мМ, что согласуется с имеющейся в литературе экспериментальной информацией (0,001 мМ в [1]).

Построенная модель в первом приближении качественно описывает процесс закачки нейромедиатора обратно после прохождения нервного импульса и может быть использована для математического описания полного цикла движения медиаторов в нейронах. В дальнейшем планируется смоделировать процесс синтеза нейромедиаторов и процесс их движения к рецепторам на постсинаптическом нейроне.

1. Nicholls J.G., Martin A.R., Wallace B.G., Fuchs P.A., From Neuron To Brain (4th ed), Sinauer Associates, Inc (2001).
2. Melkikh A.V., Seleznev V.D. J.Theor.Bio, **248**, 350 (2007).
3. Melkikh A.V., Sutormina M.I., Developing Synthetic Transport Systems, Springer Netherlands (2013).

РЕШЕНИЕ КОНЕЧНОЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА НА СИСТЕМАХ С ОБЩЕЙ ПАМЯТЬЮ

Данилов М.Ю.* , Исаков С.Н.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России

Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail:mike.d.ft402@gmail.com

Одной из актуальных в настоящее время задач является исследование свойств парамагнетиков. В данной работе проводится исследование электронной структуры молекулярного магнетика V_{15} при помощи конечной модели Хаббарда, гамильтониан которой имеет следующий вид:

$$\hat{H} = - \sum_{i \neq j} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \sum_i \hat{U} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \sum_i \mu n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1)$$

Решение модели Хаббарда методом точной диагонализации предусматривает нахождение собственных значений и собственных векторов матрицы гамильтониана, используя метод Арнольди.[1] Для описания реальных низкоразмерных систем данный метод требует организации эффективной обработки матриц большой размерности, что приводит к необходимости реализации дополнительных методов эффективного хранения данных.

В данной работе решение модели Хаббарда предлагается проводить на системах с общей памятью. При этом, ввиду ограниченного объема необходимо минимизировать память, требуемую при решении задачи. Для этих целей было предложено два метода.